

ESCOLA UNIVERSITÀRIA D'ENGINYERIA TÈCNICA INDUSTRIAL DE BARCELONA

ENGINYER TÈCNIC INDUSTRIAL. Especialitat en Química Ind.

Assignatura: Quimiometria		Sigles: QM
		Codi: 15773
		Versió: 2005
Tipus: Optativa	Crèdits totals: 6	Hores/setmana totals: 4
	Crèdits presencials Teoria: 2,25	Hores/setmana presencials Teoria: 1,5
	Crèdits presencials Problemes: 2,25	Hores/setmana presencials Problemes: 1,5
Quadrimestre: Q3	Crèdits presencials Laboratori: 0,75	Hores/setmana presencials Laboratori: 0,5
	Crèdits no presencials: 0,75	Hores/setmana no presencials: 0,5
Àrees de coneixement (BOE): Enginyeria Química. Química Analítica.		
Descriptors (BOE): Aplicació dels mètodes estadístics i d'optimització a les dades experimentals: organització i integració de dades, hipòtesis i tests estadístics, anàlisi de la varianza, dissenys d'experiments, optimització d'experiments.		
Responsable: Eva Carral		
Prerequisits:		
Corequisits: MEEQ		
Objectius: Ensenyar l'alumne a obtenir conclusions de les dades obtingudes dels experiments que es realitzen amb la finalitat d'obtenir informació química o biològica d'un sistema material. També s'introdueix l'alumne en la modelització del sistema capaç de guiar-nos cap a la modelització del problema.		
Programa:		
Tema 1: Introducció. (1h) Introducció a la Quimiometria. Problemes analítics. Errors en l'anàlisi quantitatiu. Tipus d'error. Maneig d'errors sistemàtics. Planificació i disseny d'experiments.		
Tema 2: Errors en l'anàlisi clàssic. Estadística de mesures repetides. (2h) Presentació de resultats. Conceptes estadístics fonamentals. Distribució de mesures repetides. Definició de mostra. Distribució mostral de la mesura. Límits de confiança de la mesura per a mostres grans. Límits de confiança de la mesura per a mostres petites. Altres usos dels límits de confiança. Límits de confiança de la mesura geomètrica per a una distribució logarítmico-normal. Propagació d'errors aleatoris i sistemàtics.		
Tema 3: Proves de significació. (5h) Introducció. Comparació d'una mesura experimental amb un valor conegut. Comparació de dos mesures experimentals. Prova t per parelles. Proves d'una i dues cues. Prova F per a comparació de desviacions estàndards. Valors anòmals. Anàlisi de varianza. Comparació de diverses mesures. L'aritmètica dels càlculs ANOVA. Separació i estimació de variants utilitzant ANOVA. ANOVA de dos factors. Prova xi-quadrat. Prova de la normalitat d'una distribució. Conclusions a partir de les proves de significació.		
Tema 4: Mesures analítiques de qualitat. (3h) Introducció. Mostreig. Estratègia de mostreig. Mètodes de control de qualitat. Diagrames Swhart per a valors mitjans i per a rangs. Establiment de la capacitat del procés. Esquemes d'anàlisi d'habilitat. Assaigs de col laboració. Representacions gràfiques de dues mostres. Preparació d'un assaig de col laboració. Càlculs en assaigs de col laboració. Incertesa.		
Tema 5: Mètodes de calibratge en anàlisi instrumental: Regressió i correlació. (4h) Introducció a l'anàlisi instrumental. Gràfics de calibratge en anàlisi instrumental. Coeficient de correlació moment-producte. Recta de regressió de y sobre x. Errors en el pendent i ordenada a l'origen de la recta de regressió. Càlcul de la concentració i el seu error aleatori. Límits de detecció. Mètode de les addicions estàndard. Ús de rectes de regressió per a la comparació de mètodes analítics. Rectes de regressió ponderades. Intersecció de dos línies rectes. Càlculs de regressió i ANOVA. Mètodes de regressió curvilínia. Ajust de corbes.		
Tema 6: Mètodes no paramètrics i robustos. (4h) Introducció. Mitjana: anàlisi de dades inicials. Prova de signes. Prova de ratxes de Wald-		

Wolfowitz. Prova de rangs i signes de Wilcoxon. Proves simples per a dos mostres independents. Proves no paramètriques per a més de dos mostres. Correlació ordinal. Mètodes de regressió no paramètrics. Mètodes robustos. Mètodes de regressió robustos. Prova de bondat de l'ajust de Kolmogorov. Conclusions.

Tema 7: Disseny experimental i optimització. (4h)

Introducció. Randomització i experiments amb blocs. Anova de dos factors. Quadrats llatins i altres dissenys. Interaccions. Disseny factorial davant de la d'un factor cada cop. Disseny factorial i optimització. Optimització: principis bàsics i mètodes univariants. Optimització utilitzant un mètode de cerca de variable alternativa. Mètode de màxim pendent o de gradient. Optimització pel mètode Simplex. Templat simulat.

Tema 8: Anàlisi de multivariants. (1,5h)

Introducció. Anàlisi inicial. Anàlisi dels principals components. Anàlisis agrupats. Anàlisi discriminant. Mètode del veí més pròxim. Regressió múltiple. Regressió multivariant. Regressió parcial de mínims quadrats. Calibratge multivariant. Xarxes de neurones artificials.

Pràctiques de Laboratori:

1. Utilització de full de càlcul per aplicació d'ANOVA de dos factors sense replicats. (2h)
2. Utilització de full de càlcul per aplicació d'ANOVA de dos factors amb replicats. (3,5h)
3. Utilització de full de càlcul per regressió lineal. (2h)

Activitats No Presencials:

1. Realització d'un cas pràctic tutelat pel professor.

Bibliografia Bàsica:

1. MILLER, J.N.; MILLER, J.C. "Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry". Fourth edition. Prentice Hall. 2000
2. HARVEY, D. "Química Analítica Moderna". Mc Graw Hill. 2002

Bibliografia Complementària:

1. SEGURA, P. "Tratamiento de datos y análisis de error con microprocesador o calculadora". PPU. 1985
2. SKOOG; WEST; HOLLER. "Química Analítica I". 4ª edición. Editorial Reverté. 1996

Sistema d'avaluació:

Controls de seguiment:	Primer:	45%	Segon:	0%	Prova final:	45%
No presencialitat:	5%	Pràctiques:	5%	Altra:	0%	